数理解析研究所講究録
259巻 1976年 119-135

グラフの固有値について

日本医大　秋山　仁
東海大理　恵羅　博
上智大理工　斉藤　友克
専修大経営　佐藤　創

現在にいたるまで、グラフに対する簡明な形の不変数は知られていない。知られているグラフの不変数は多くあるが、グラフの隣接行列の固有値と重複度は、グラフ理論の興味ある数多くの問題を代数的に解明することが出来る点において重要と考えられる。

§1. グラフの固有値

ここでグラフとは、単純グラフとする。即ち、多重辺、ループを含まない無向グラフとする。グラフ G を $G=(V,E)$ と書き、V を G の点集合、E を G の線集合とし、V, E の元をそれぞれ v_i, e_j と表わす。($i=1,\cdots,n$, $j=1,\cdots,m$)

（定義1）

n個の点をもつグラフGの隣接行列$A=(a_{ij})$は、Gの点に適当に標識（$v_1, \cdots, v_n$）を付け点v_iとv_jが隣接しているとき$a_{ij}=1$，その他の場合に$a_{ij}=0$となる$n\times n$行列である。

このとき、Aは実対称行列となるからAのすべての固有値は実数となる。

（定義2）

n個の点、m個の線をもつグラフGの接合行列Xとは、点と線を適当に標識付け$\{v_1, \cdots, v_n\}$，$\{e_1, \cdots, e_m\}$し、点v_iと線e_jとが接合していればXの（i,j）要素$x_{ij}=1$，そうでなければ$x_{ij}=0$として得られる$n\times m$行列である。

これらよりグラフの固有値、重複度に関する多くの結果が知られている。

（命題1）

グラフGの隣接行列をA、接合行列をXとすると

$$A = X\,{}^tX - K$$

ここで
$$K=\begin{pmatrix} k_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & k_n \end{pmatrix}$$
k_i；v_iの次数

特に、Gが次数kの正則グラフならば

$$A = X\,{}^{t}X - kI_n \qquad (I_n\text{；単位行列})$$

（定義3）

グラフHがグラフGの全域部分グラフであるとは、HがGの点をすべて含む部分グラフのことである。

（定義4）

Gの隣接行列Aの固有値のことをグラフGの固有値と呼ぶ。又Gのスペクトラムとは、Gの固有値の分布で、これを

$Spec\,G = \begin{pmatrix} \lambda_1 \cdots & \lambda_s \\ m_1 \cdots & m_s \end{pmatrix}$ で表わす。ここで$\lambda_1, \cdots, \lambda_s$は$s$個の相異なるGの固有値で$\lambda_1 > \cdots > \lambda_s$とし、$\lambda_i$の重複度を$m_i$とする。

従って、$\sum_{i=1}^{s} m_i = n$.

（定義5）

Gの最大固有値をGのノルムと呼んで$\|G\|$で表わす。

このときSchwarzの不等式より$\|G\| \leqq \sqrt{\frac{2m(n-1)}{n}}$が得られる。

(命題2)

(i) グラフHがグラフGの部分グラフならば

$$\|H\| \leqq \|G\|$$

(ii) グラフGが連結ならば、最大固有値の重複度は1である。

証明

(i) HがGの全域部分グラフでなければ、適当に孤立点をつけて、Gの全域部分グラフ$\bar{H}$とすることが出来る。この操作で作った$\bar{H}$の固有値は、つけ加えた孤立点の個数の重複度だけ0が増すだけである。

Gの隣接行列をA、$\bar{H}$の隣接行列をBとすると、各成分ごとに $a_{ij} \geqq b_{ij}$ である。よってPerron-Frobeniusの定理より、最大固有値は $\lambda_A \geqq \lambda_B \geqq 0$ となる。

(ii) Gが連結なら隣接行列Aは非分離となるから、最大固有値の重複度は1となる。

(定義6)

グラフGの固有多項式とは $\chi(\lambda, G) = \det(\lambda I_n - A)$ とする。

（命題3）

$\chi(\lambda, G)$ の $n-i$ 次の係数 C_i とグラフの間には以下の関係がある。

$$C_0 = 1$$

$$C_1 = 0$$

$$C_2 = -m$$

$$C_3 = -2 \times (G\text{に含まれる3角形の数})$$

$$C_4 = n_1 - 2n_2 \quad \left\{ \begin{array}{l} n_1 ; G\text{に含まれる disjoint な edge の pair の数} \\ n_2 ; G\text{に含まれる長さ4の circuit の数} \end{array} \right.$$

（命題4）

G を最大次数 d_1、最小次数 d_2 のグラフとすれば

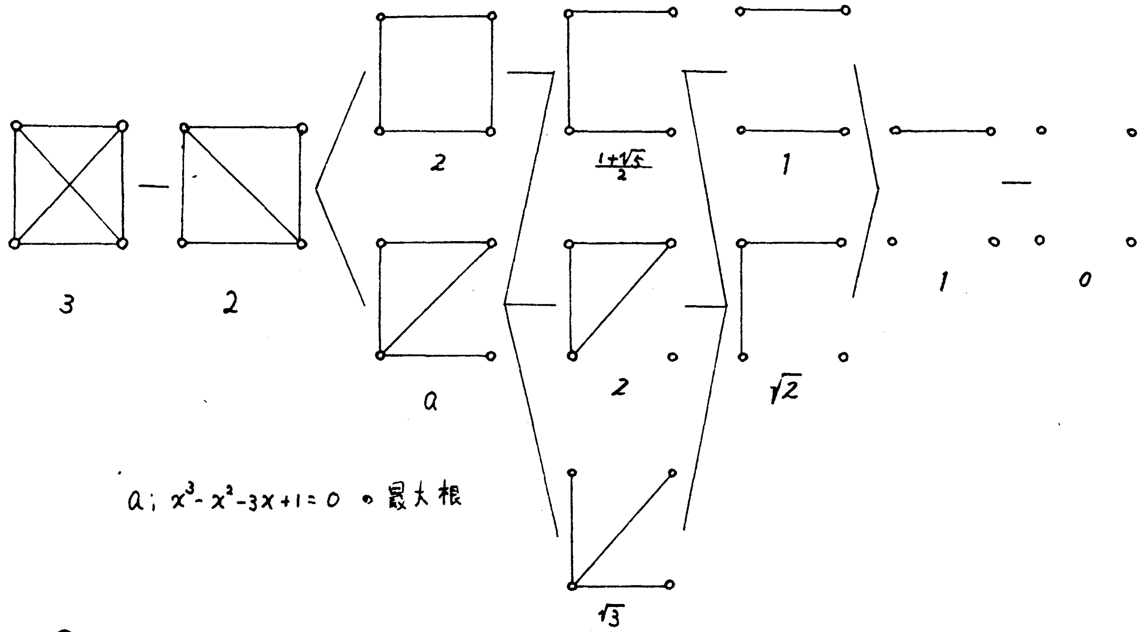
$$\max(d_2, \sqrt{d_1}) \leqq \| G \| \leqq d_1$$

（命題5）

G が2組グラフであるための必要十分条件は、スペクトラムが原点対称である。

（命題６）

連結グラフGが２組グラフであるための必要十分条件は－‖G‖もヌGの固有値である。



a ; $x^3-x^2-3x+1=0$ の最大根

§2. Line graph, Midle graph, Total graphのノルムの大小関係

（命題１）

$L(G)$をグラフGの線グラフとすると、$L(G)$の隣接行列A_Lは次の様に表わせる。

$$A_L = {}^tXX - 2I_m$$

ここでXはGの接合行列、I_mは単位行列

（命題2）

$M(G)$をグラフGの中間グラフとすると、$M(G)$の隣接行列A_Mは次の様に表わせる

$$A_M = \begin{pmatrix} A_L & {}^tX \\ X & 0 \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{l} X\text{；接合行列} \\ 0\text{；零行列} \end{array}$$

（命題3）

$T(G)$をグラフGの全グラフとすると、$T(G)$の隣接行列A_Tは次の様に表わせる。

$$A_T = \begin{pmatrix} A_L & {}^tX \\ X & A \end{pmatrix}$$

（命題4）

G，$L(G)$，$M(G)$，$T(G)$の間のノルムには以下の関係がある。

$$\| L(G) \| \leqq \| M(G) \| \leqq \| T(G) \|$$

$$\| G \| \leqq \| T(G) \|$$

§3．G．$L(G)$，$M(G)$．$T(G)$のスペクトラムの関係

（命題１）

Gをk次正則グラフとすると$L(G)$、Gの間の固有値と重複度の間には、以下の関係がある。$L(G)$、Gの固有値をそれぞれρ、λとすると

(i) $\rho \neq -2$、$\lambda \neq -k$の固有値は $\lambda - \rho = 2 - k$ 対応し、重複度も一致する。

(ii) $\rho = -2$ の重複度は $\dim(\mathrm{Ker}\,{}^tXX)$、$\lambda = -k$ の重複度は $\dim(\mathrm{Ker}\,X\,{}^tX)$ であたえられる。

証明

AをGの隣接行列 A_L を$L(G)$の隣接行列とする。xをAの固有値λに対応する固有ベクトルとする。

ただし $\lambda \neq -k$

よって、 $Ax = \lambda x$ となる

又 $A = X\,{}^tX - kI_n$ より

$$X\,{}^tX\,x = (\lambda + k)x$$

$\lambda \neq -k$ より ${}^tX\,x \neq 0$

両辺に${}^tX$をかけると

$$({}^tXX)\,{}^tX\,x = (\lambda + k)\,{}^tX\,x$$

${}^tXX = A_L - 2I_m$ より

$$A_L({}^tX\,x) = (\lambda + k - 2)\,{}^tX\,x$$

よって、A_L の固有値は $\lambda+k-2$、固有ベクトルは ${}^tX\boldsymbol{x}$ であたえられる。

一方、$\rho\neq-2$ なる A_L の固有値はすべて上記の式であたえられる。

なぜなら、$\boldsymbol{y}$ を ρ に対応する固有ベクトルとすると

$A_L={}^tXX-2I_m$ より

$${}^tXX\boldsymbol{y}=(\rho+2)\boldsymbol{y}$$

$\rho\neq-2$ より　$X\boldsymbol{y}\neq\boldsymbol{0}$

$$(X\,{}^tX)X\boldsymbol{y}=(\rho+2)X\boldsymbol{y}$$

$$AX\boldsymbol{y}=(\rho-k+2)X\boldsymbol{y}$$

よって示された。

$\rho=-2$ の場合　${}^tXX\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}$　$\therefore\ \boldsymbol{y}\in\mathrm{Ker}\,{}^tXX$

同様にして

$\lambda=-k$ の場合　$X\,{}^tX\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$　より　$\boldsymbol{x}\in\mathrm{Ker}\,X\,{}^tX$

(命題2)

G の中間グラフ $M(G)$ と $L(G)$ の固有値の間には、以下の関係がある。

$M(G)$、$L(G)$ の固有値をそれぞれ μ、ρ とすると

(i)　$\mu^2-\rho\mu-(\rho+2)=0$　の関係がある。

(ii)　$\mu\neq0$、$\rho\neq-2$　の場合、μ、ρ の重複度は一致する。

$\mu = 0$ の場合 μ の重複度は

$$(1 + \dim(\mathrm{Ker}\,{}^tX))\theta + \dim(\mathrm{Ker}\,{}^tX)\,\delta_{\theta,0}$$

ここで $\theta = \dim(\mathrm{Ker}X \cap \mathrm{Im}\,{}^tX)$

$\rho = -2$ の場合 ρ の重複度は $\dim(\mathrm{Ker}\,{}^tXX)$

証明

(i) A_M の固有値 $\mu \neq 0$ は、A_L の固有値 ρ によって、

$\rho = \dfrac{\mu^2 - 2}{\mu + 1}$ と表わせる。

$A_M \boldsymbol{z} = \mu \boldsymbol{z}$ $\quad \boldsymbol{z} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{z}_1 \\ \boldsymbol{z}_2 \end{pmatrix}$ とする。$\boldsymbol{z}_1 \neq 0$

$A_M = \begin{pmatrix} A_L & {}^tX \\ X & 0 \end{pmatrix}$ より

$$\begin{cases} A_L \boldsymbol{z}_1 + {}^tX \boldsymbol{z}_2 = \mu \boldsymbol{z}_1 \\ X \boldsymbol{z}_1 = \mu \boldsymbol{z}_2 \end{cases}$$ がえられる。

$\boldsymbol{z}_2 = \frac{1}{\mu} X \boldsymbol{z}_1$ より

$A_L \boldsymbol{z}_1 + \frac{1}{\mu}\,{}^tXX\boldsymbol{z}_1 = \mu \boldsymbol{z}_1$

${}^tXX = A_L + 2I_m$ であるから

$(1 + \frac{1}{\mu}) A_L \boldsymbol{z}_1 = (\mu - \frac{2}{\mu}) \boldsymbol{z}_1$

ところで $\mu \neq -1$ である

$(\because \mu = -1 \Rightarrow \boldsymbol{z}_1 = 0,\ \boldsymbol{z}_2 = 0 \quad \text{i.e. } \boldsymbol{z} = 0)$

$A_L \boldsymbol{z}_1 = \dfrac{\mu^2 - 2}{\mu + 1} \boldsymbol{z}_1$

(iii) 又. A_L の $\rho \neq -2$ なる固有値 ρ は $\mu^2 - \rho\mu - (\rho+2) = 0$

の方程式によって A_M の固有値を表わす.

$A_L y = \rho y \quad y \neq 0$ とする

$z_1 = y$, $z_2 = \frac{1}{\mu} X y$ とおくと、

$$\begin{pmatrix} A_L & {}^tX \\ X & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_L y + \frac{1}{\mu}\,{}^tX X y \\ X y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\rho + \frac{\rho+2}{\mu}) y \\ X y \end{pmatrix}$$

$$= \mu \begin{pmatrix} y \\ \frac{1}{\mu} X y \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}$$

ここで ρ は $\mu^2 - \rho\mu - (\rho+2) = 0$ の根

∴ μ は A_M の固有値である

重複度も一致する.

$\mu = 0$ の場合

$\mathrm{Ker}\,{}^tX \neq 0$ ならば

$z_2 \in \mathrm{Ker}\,{}^tX \quad z_2 \neq 0$ とすると

$$\begin{pmatrix} A_L & {}^tX \\ X & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} {}^tX z_2 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

∴ $\mu = 0$ は固有値となる

$\mathrm{Ker}\,X \cap \mathrm{Im}\,{}^tX \neq 0$ ならば

$z_1 \in \mathrm{Ker}\,X \cap \mathrm{Im}\,{}^tX$ とおくと $z_1 \neq 0$

$X z_1 = 0 \quad {}^tX X z_1 = 0 \quad A_L z_1 = -2 z_1$

よって、A_L は固有値 -2 を有する

$\lambda \boldsymbol{z}_1 \in Im\,{}^tX$ より，${}^tX\boldsymbol{z}_2 = \lambda\boldsymbol{z}_1$ を満たすベクトル$\boldsymbol{z}_2$が存在する．

$$\boldsymbol{z} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{z}_1 \\ \boldsymbol{z}_2 \end{pmatrix} \text{ とすれば}$$

$$A_M \boldsymbol{z} = \boldsymbol{0}$$

$\therefore$ $\mu = 0$ はA_M の固有値

（命題3）

Gをk次正則グラフとするとGの中間グラフ$M(G)$の固有値μは，次のことが成立する．

(i) $\mu \neq -2$は次の方程式の根である．

$$\mu^2 - (\lambda + k - 2)\mu - (\lambda + k) = 0$$

ここでλはGの固有値

(ii) $\mu \neq -2$ の重複度はλと一致する

$\mu = -2$ の重複度は $(1 + dim(Ker X))\theta + dim(Ker X)\delta_{0\,0}$

$$\theta = dim\,(Ker\,{}^tX \cap Im\,X)$$

（命題4）

k次正則グラフGの全グラフ$T(G)$の固有値τは$L(G)$の固有値ρによって以下のごとく表わせる。

(i) $\tau \neq -k$ であれば次の方程式の根である。

$$\tau^2+(k-2\rho-2)\tau+\rho^2+(1-k)\rho-2=0$$

τの重複度はρと等しい

(iii) $\tau=-k$ の重複度は

$$(1+\dim(\mathrm{Ker}\,{}^tX))\varphi+\dim(\mathrm{Ker}\,{}^tX)\delta_{\varphi,0}$$

ここでφは

$k=1$ 　　$\varphi=1$

$k=2$ 　　$\varphi=\dim(\mathrm{Ker}\,X)+\dim((\rho=1$の固有空間$)\cap\mathrm{Im}\,{}^tX)$

$k=3$ 　　$\varphi=\dim((\rho=-2$の固有空間$)\cap\mathrm{Im}\,{}^tX)$

$k\geqq4$ 　　$\varphi=\dim(\mathrm{Ker}\,X\cap\mathrm{Im}\,{}^tX)$

証明

1. $A_T w=\tau w$ 　　$w=\begin{pmatrix}w_1\\w_2\end{pmatrix}$ とすると

$$A_T=\begin{pmatrix}A_L & {}^tX\\ X & A\end{pmatrix}$$ より

$$\begin{cases}{}^tXXw_1+{}^tXw_2=(\tau+2)w_1 & \text{—①}\\ Xw_1+X{}^tXw_2=(\tau+k)w_2 & \text{—②}\end{cases}$$

②に${}^tX$を左からかけて

$${}^tXXw_1+{}^tXX{}^tXw_2=(\tau+k){}^tXw_2$$

①より

${}^tXw_2=-{}^tXXw_1+(\tau+2)w_1$を代入して整理すると

$${}^tX X {}^tX X w_1 - (2\tau + k - 3)\,{}^tX X w_1 + (\tau+2)(\tau+k)\, w_1 = 0$$

(1) $w \neq 0$ ならば w_1 は ${}^tXX$ の したがって A_L の固有ベクトルである．対応する固有値を ρ とすれば

$${}^tX X w_1 = (\rho+2) w_1$$

$$\therefore\quad (\rho+2)^2 - (2\tau + k + 3)(\rho+2) + (\tau+2)(\tau+k) = 0$$

$$\therefore\quad \tau^2 - (2\rho - k + 2)\tau + \rho^2 + (1-k)\rho - 2 = 0 \quad \cdots (*)$$

$w_1 = y$　$A_L y = \rho y$ とおけば

$$\begin{cases} (\rho + 2) y + {}^tX w_2 = (\tau+2) y \\ X y + X {}^tX w_2 = (\tau + k) w_2 \end{cases} \qquad \therefore\ {}^tX w_2 = (\tau-\rho) y$$

$$\therefore\quad X y + (\tau - \rho) X y = (\tau + k) w_2$$

$$(1 + \tau - \rho) X y = (\tau + k) w_2$$

(1.1)　$\tau \neq -k$ ならば　$w_2 = \dfrac{1+\tau-\rho}{\tau + k} X y$

(1.2)　$\tau = -k$ ならば

$${}^tX w_2 = -(\rho + k) y\ .\quad (1 - k - \rho) X y = 0$$

$$(\rho+2)(\rho + k - 1) = 0$$

◦ $\rho = -2$ ならば　${}^tX w_2 = (2 - k) y$

$k = 2 \Rightarrow w_2 = 0$ or $w_2 \in \mathrm{Ker}\,{}^tX \neq 0$

$k \neq 2,\ k \neq 3 \Rightarrow y \in \mathrm{Ker}\,X \cap \mathrm{Im}\,{}^tX \neq 0$

◦ $\rho = 1 - k$ ならば　${}^tX w_2 = -y$

$y \in (\rho = 1 - k$ の固有空間$) \cap \mathrm{Im}\,{}^tX$

(2) $w_1 = 0$ ならば

$$\begin{cases} {}^tX w_2 = 0 \\ X\,{}^tX w_2 = (\tau + k) w_2 \end{cases}$$

$$0 \neq w_2 \in \mathrm{Ker}\,{}^tX \neq 0$$

$$\tau = -k$$

2. (1) $A_L y = \rho y \qquad y \neq 0$ とすると

τ を (*) によって決定される $\tau \neq -k$ なる根とすると.

$w_1 = y \qquad w_2 = \dfrac{1+\tau-\rho}{\tau+k} X y \qquad w = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}$ とおくと

(*) の関係より $A_T w = \tau w$ である

したがって $\tau\ (\neq -k)$ は A_T の固有値である

(2) $k \neq 3 \quad \mathrm{Ker}\,X \neq 0$ ならば

$0 \neq y \in \mathrm{Ker}\,X$ とする $\qquad Xy = 0$

w_2 を ${}^tX w_2 = (2-k) y$ を満たすベクトルとすれば

$$A_T \begin{pmatrix} y \\ w_2 \end{pmatrix} = -k \begin{pmatrix} y \\ w_2 \end{pmatrix}$$ が成り立つ

よって $-k$ は A_T の固有値である.

(3) $A_L y = (1-k) y \quad y \neq 0$ なる A_L の固有ベクトルが存在したとする。w_2 を ${}^tX w_2 = -y$ を満たすベクトルをすれば

$$A_T\begin{pmatrix} y \\ w_2 \end{pmatrix} = -k\begin{pmatrix} y \\ w_2 \end{pmatrix}$$ が成り立つ

よって $-k$ は A_T の固有値である

(4) $\mathrm{Ker}\,{}^tX \neq 0$ ならば $0 \neq w_2 \in \mathrm{Ker}\,{}^tX$ とし

$w = \begin{pmatrix} 0 \\ w_2 \end{pmatrix}$ とすれば

$A_T w = -kw$ が成り立つ

よって $-k$ は A_T の固有値である

（命題5）

k次正則グラフ G の全グラフの固有値 τ は G の固有値 λ によって次の様に表わせる。

(i) $\tau \neq -2$ の重複度は λ を一致する

$\tau = -2$ の重複度は

$(1+\dim(\mathrm{Ker}X))\varphi + \dim(\mathrm{Ker}X)\delta_{\varphi,0}$

$k=1$ $\varphi = 1$

$k=2$ $\varphi = \dim((\lambda=-1$ の固有空間$)\cap \mathrm{Im}X) + \dim(\mathrm{Ker}\,{}^tX)$

$k=3$ $\varphi = \dim((\lambda=-1$ の固有空間$)\cap \mathrm{Im}X) + \dim(\mathrm{Ker}\,{}^tX \cap \mathrm{Im}X)$

——参考文献——

[1] J. Akiyama, T. Hamada, I. Yoshimura ;
Miscellaneous Properties of Middle Graphs, TRU
Math. Vol. 10 (1974) 41 - 53

[2] N. Biggs ; Algebraic Graph Theory, Cambridge
Univ. Press , Reading (1974)

[3] M. Doob ; Eigenvalues of a Graph and its
Imbeddings, J. Combi. Theory, Ser B, Vol. 17.
No. 3 (1974) 244 - 248

[4] F.R. Gantmacher. "Theory of Matrices," Chelsea ,
1959

[5] F. Harary ; "Graph Theory" Addison - Wesley (1969)

[6] A. J. Hoffman ; On the polynomial of a graph,
Amer. Math. Monthly 70 (1963) 30 - 36

[7] ——— ; Some resent results on spectral
properties of graphs, Beiträge zur Graphentheorie,
PP 75 - 80 Leipzig (1968)

[8] L. Lovász and J. Pelikán ; On the eigenvalues
of trees, Periodica Math. Hug. : Vol 3
(1-2), (1973) 175 - 182